

УДК 531.19

Г. С. Бокун, кандидат физико-математических наук, доцент (БГТУ);

Д. В. Гапанюк, кандидат физико-математических наук, старший преподаватель (БГТУ)

**ПРЯМАЯ ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ РАСЧЕТА  
СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ РЕШЕТОЧНОЙ СИСТЕМЫ  
С ПОМОЩЬЮ ПОТЕНЦИАЛОВ СРЕДНИХ СИЛ**

В работе выполнены конкретные расчеты и показано, что обобщение подхода на многочисленные потенциалы средних сил позволяет найти значение статистической суммы в случае плоской квадратной решетки с достаточно высокой точностью.

In work concrete calculations are executed and is shown that approach generalization on numerous potentials of average forces allows to find value of the statistical sum in case of a flat square lattice with enough split-hair accuracy.

**Введение.** С помощью одночастичных потенциалов статистическая сумма представляется средним от произведения некоторых сомножителей, наибольшее и наименьшее значения которых используются для формирования верхней и нижней границ искомой величины. Зависимость названных граничных значений от введенных потенциалов применяется для минимизации расстояния между обеими границами и определения статистической суммы с соответствующей точностью.

Рассмотрим плоскую квадратную решетку из  $N$  узлов, заселенность которых характеризуется числами заполнения  $n_i = 0, 1$ . В соответствии с моделью Изинга энергия системы представляется в форме

$$U_N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j(i)} J n_i n_j, \quad (1)$$

где  $J$  – энергия парного взаимодействия частиц, являющихся ближайшими соседями;  $\sum_{j(i)}$  озна-

чает суммирование по ближайшим узлам вокруг  $i$  узла.

**1. Использование одночастичных потенциалов.** Наряду с исходной, рассмотрим базисную подсистему с одночастичным взаимодействием [1]:

$$U_N^0 = \sum_{i=1}^N \sum_{j(i)} \varphi_i n_i. \quad (2)$$

В дальнейшем для однородной среды все  $\varphi_j$  одинаковы, т. е.  $\varphi_j = \varphi$ .

Определения (1) и (2) используем для записи большой статистической суммы исходной системы в форме тождества:

$$Z_N = Z_N^0 \times \sum_{n_1, n_2, \dots} \prod_{i=1}^N \prod_{j(i)}^* \exp\{-\beta(J n_i n_j - \varphi_{(n_i)} - \varphi_{(n_j)})\} c_{n_i}, \quad (3)$$

где  $\prod^*$  означает, что учитываются только два  $j j^*$  узла, расположенные соответственно справа и снизу от  $i$  узла;  $\beta$  – обратная температура;  $c_i$  – средняя заселенность  $i$  узла в базисной системе, равная

$$c_{n_i} = \frac{\exp(\beta(\mu - 4\varphi)n_i)}{\exp(1 + \exp(\beta(\mu - 4\varphi)n_i))}, \quad (4)$$

здесь  $\mu$  – химический потенциал.

Следовательно, статистическая сумма базисной системы вычисляется по формуле

$$Z_N^0 = (1 + \exp(\beta(\mu - 4\varphi)))^N = \frac{1}{c_0^N}. \quad (5)$$

Выделим в (3) составляющую, соответствующую первому узлу (2 и 2\* отвечают узлам, расположенным справа и снизу по отношению к первому узлу), и перепишем  $Z_N$  в форме

$$Z_N = \frac{1}{c_0} \sum_{n_2, n_{2^*}} \left[ c_0 \exp\{\beta(\varphi_{n_2} + \varphi_{n_{2^*}})\} + c_1 \exp\{J n_2 + J n_{2^*} - 2\varphi - \varphi_{n_2} - \varphi_{n_{2^*}}\} \right] S_{(n_2, n_{2^*})}, \quad (6)$$

где

$$S_{(n_2, n_{2^*})} = \frac{1}{c_0^N} \times \sum \prod_{n_3, \dots} \prod_{i=2}^N \prod_{j(i)} c_{n_i} \exp\{-\beta(J n_i n_j - \varphi_{n_i} - \varphi_{n_j})\}. \quad (7)$$

Отметим, что

$$\sum_{n_2, n_{2^*}} S_{(n_2, n_{2^*})} = Z_{N-1}, \quad (8)$$

где  $Z_{N-1}$  соответствует статистической сумме системы из  $N-1$  узлов.

Выражение в квадратных скобках (6) перепишем в форме

$$K_{(n_2, n_{2^*})} = X^{-(n_2 + n_{2^*})} + e^{\beta\mu} W^{(n_2 + n_{2^*})} X^{(2 - n_2 - n_{2^*})}. \quad (9)$$

В (9) введены обозначения

$$W = e^{-\beta J}, \quad X = e^{-\beta \phi}. \quad (10)$$

С учетом обозначения (8) и (9) выражение для (6) принимает вид

$$Z_N = \sum_{n_2, n_2^*} K_{(n_2, n_2^*)} S_{(n_2, n_2^*)}. \quad (11)$$

Очевидно, что с учетом (8) для  $Z_n$  можем записать следующие неравенства:

$$Z_{N-1} \min_{(n_2, n_2^*)} K_{(n_2, n_2^*)} < Z_N < Z_{N-1} \max_{(n_2, n_2^*)} K_{(n_2, n_2^*)}. \quad (12)$$

Далее вводя  $Z$  как статистическую сумму, отнесенную к одному узлу, и учитывая зависимость  $K$  от параметра  $\phi$ , запишем, что нижняя и верхняя границы для статистической суммы определяются условиями

$$\max_{(\phi)} \min_{(n_2, n_2^*)} K_{(n_2, n_2^*)} < Z < \min_{(\phi)} \max_{(n_2, n_2^*)} K_{(n_2, n_2^*)}. \quad (13)$$

Условие (13) используем для оценки  $Z$  при различных условиях, которые зависят от величин  $W$  и

$$M = e^{\beta \mu}. \quad (14)$$

С учетом обозначений (10) и (14) выражение (9) представляется тремя функциями

$$K(0, 0) = 1 + Mx^2, \quad (15)$$

$$K(0, 1) = \frac{1}{x} + MWx, \quad (16)$$

$$K(1, 1) = \frac{1}{x^2} + MW^2. \quad (17)$$

Каждая из трех величин (15)–(17) при выбранных  $M$  и  $W$ , задающих термодинамические условия системы, зависит от переменной  $x$ , что будет использовано для взаимного сближения границ для искомого значения  $Z$ , определяемого условиями (13).

Вычислим

$$K1(x) = \min \begin{bmatrix} 1 + Mx^2 \\ \frac{1}{x} + MWx \\ \frac{1}{x^2} + MW^2 \end{bmatrix}, \quad (18)$$

$$K2(x) = \max \begin{bmatrix} 1 + Mx^2 \\ \frac{1}{x} + MWx \\ \frac{1}{x^2} + MW^2 \end{bmatrix} \quad (19)$$

и запишем

$$m1 = \max(K1(x)), \quad m2 = \min(K1(x)), \quad (20)$$

после чего найдем наилучшую оценку для значения статистической суммы решетки с помощью одночастичных потенциалов средних сил.

Рассмотрим сначала результаты при условии

$$e^{\beta \mu} W^2 = 1, \quad (21)$$

при котором известно точное решение [2]. В табл. 1 представлены результаты определения  $m1$  и  $m2$  и их сравнение с точным значением  $Z$ .

Таблица 1

Оценка значения статистической суммы при  $\mu = 2J$

| $W$ | $m1$  | $Z$   | $m2$  |
|-----|-------|-------|-------|
| 2   | 1,42  | 1,458 | 1,56  |
| 3   | 1,19  | 1,252 | 1,333 |
| 4   | 1,102 | 1,143 | 1,25  |
| 5   | 1,046 | 1,080 | 1,20  |
| 6   | 1,039 | 1,045 | 1,167 |
| 7   | 1,027 | 1,030 | 1,143 |
| 8   | 1,020 | 1,021 | 1,125 |
| 9   | 1,015 | 1,016 | 1,111 |
| 10  | 1,012 | 1,013 | 1,10  |

Как видно из табл. 1, ширина «щели» между наибольшим и наименьшим значением не превышает относительную погрешность. Как следует из табл. 2, при условиях, соответствующих точному решению  $\mu = 2J$ , погрешность подхода минимальна.

Таблица 2

Оценка значения статистической суммы при  $W = 5$  и изменении химического потенциала на различную величину

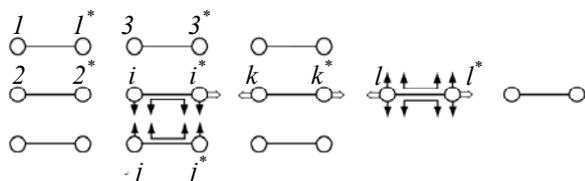
| $\Delta\mu/J$ | $m1$  | $m2$  |
|---------------|-------|-------|
| -1,0          | 1,009 | 1,01  |
| -0,5          | 1,021 | 1,031 |
| -0,3          | 1,031 | 1,056 |
| -0,2          | 1,038 | 1,081 |
| -0,1          | 1,047 | 1,125 |
| 0             | 1,06  | 1,2   |
| 0,1           | 1,23  | 1,321 |
| 0,2           | 1,432 | 1,492 |
| 0,3           | 1,671 | 1,712 |
| 0,5           | 2,283 | 2,305 |
| 1             | 5,043 | 5,049 |

В табл. 2 приведены расчеты при  $\Delta\mu = \mu - 2J$ . Из представленных данных следует, что величина погрешности падает при возрастании  $\Delta\mu$  по отношению к критическому значению  $\mu = 2J$ . И, соответственно, величина погрешности в оценке значения  $Z$  при  $\mu = J$  не превышает 1% всей области изменения температур (табл. 3).

Таблица 3  
Оценка значения статистической суммы при  $\Delta\mu / J = -1$  и различных значениях  $W$

| $W$ | $m1$  | $m2$   |
|-----|-------|--------|
| 2   | 2,32  | 2,36   |
| 3   | 3,13  | 3,155  |
| 4   | 4,069 | 4,081  |
| 5   | 5,043 | 5,049  |
| 6   | 6,029 | 6,033  |
| 7   | 7,021 | 7,024  |
| 8   | 8,016 | 8,018  |
| 9   | 9,013 | 9,014  |
| 10  | 10,01 | 10,011 |

**2. Использование многочастичных потенциалов.** Рассмотрим возможность уточнения расчета статистической суммы при использовании многочастичных средних потенциалов. Для введения последних необходимо, как это было показано ранее [1], объединять узлы решетки в многоузельные аналоги (комплексы). Это позволяет представить энергию взаимодействия как сумму собственных энергий комплексов и энергию взаимодействия комплексов между собой. Здесь ограничимся случаем представления системы диаграмм (рисунок).



Представление двумерной квадратной решетки системой димеров

Каждый произвольный  $l$ -й димер содержит два узла ( $l, l^*$ ) и характеризуется собственной энергией  $\mu = Jn_l n_{l^*}$ .

С каждым димером связывается внешнее поле, характеризуемое одночастичными потенциалами  $\beta_{n_l}$  и  $\gamma_{n_l}$ , обозначенными на рисунке одинарными и двойными стрелками ( $\uparrow, \uparrow\uparrow$ ) соответственно, и двухчастичными потенциалами  $\alpha_{n_l n_{l^*}}$ , представленными на рисунке «скобами». Таким образом, собственная энергия кластера записывается в форме

$$\Phi_l = Jn_l n_{l^*} + 2\beta_{n_l} + 2\beta_{n_{l^*}} + \gamma_{n_l} + \gamma_{n_{l^*}} + 2\alpha_{n_l n_{l^*}}. \quad (22)$$

**Заключение.** Проведя расчеты для наилучшей оценки значения статистической суммы решетки с помощью многочастичных потенциалов, аналогично описанной выше методике при использовании одночастичных потенциалов, получим последовательность функций, которые как и ранее представим вектор-столбцом:

$$F(A, B, C) = \begin{bmatrix} K(0, 0, 0) \\ K(0, 1, 0) \\ K(1, 0, 0) \\ K(1, 1, 0) \\ K(0, 0, 1) \\ K(0, 1, 1) \\ K(1, 0, 1) \\ K(1, 1, 1) \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Далее определив новые функции операцией

$$\begin{aligned} F1(A, B, C) &= \min(F(A, B, C)), \\ T2(A, B, C) &= \max(F(A, B, C)), \end{aligned} \quad (24)$$

найдем величины

$$\min_{\{n_j, n_{j^*}, n_k\}} K(n_j, n_{j^*}, n_k) \text{ и } \max_{\{n_j, n_{j^*}, n_k\}} K(n_j, n_{j^*}, n_k).$$

Для вычисления величин  $m1$  и  $m2$  при выбранных  $W$  и  $M$  используем процедуры Minimize, Maximize, получаем результаты, представленные в табл. 4.

Таблица 4

Оценки значения статистической суммы при  $\mu = 2J$

| $W$ | $m1$   | $m1$   | $Z$   | $m2$  | $m2$   |
|-----|--------|--------|-------|-------|--------|
|     | 2      | 1      | 0     | 1*    | 2*     |
| 2   | –      | 1,43   | 1,458 | 1,53  | –      |
| 3   | 1,20   | 1,19   | 1,252 | 1,31  | 1,31   |
| 4   | 1,104  | 1,102  | 1,143 | 1,22  | 1,22   |
| 5   | 1,061  | 1,0604 | 1,08  | 1,174 | 1,1562 |
| 6   | 1,037  | 1,04   | 1,045 | 1,140 | 1,140  |
| 7   | 1,026  | 1,03   | 1,030 | 1,120 | 1,10   |
| 8   | 1,020  | 1,02   | 1,021 | 1,102 | 1,08   |
| 9   | –      | 1,016  | 1,016 | 1,09  | –      |
| 10  | 1,0123 | 1,012  | 1,013 | 1,08  | 1,078  |

В центральной 0-колонке приведены значения  $Z$ , отвечающие результатам Онзагера. Представленные данные отражают последовательное уточнение и указывают на то, что замена  $\alpha, \beta, \gamma$  на  $\alpha_{n_l n_{l^*}}, \beta_{n_l}, \gamma_{n_{l^*}}$  позволит находить значения  $Z$  с необходимой точностью при других  $\mu$  и  $W$ .

**Литература**

1. Вихренко, В. С. Равновесные и диффузионные характеристики интеркаляционных систем на основе решеточных моделей: монография / В. С. Вихренко, Я. Г. Грода, Г. С. Бокун. – Минск: БГТУ, 2008. – 326 с.
2. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика. В 5 т. Т. 5. Статистическая физика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М.: Наука, 1976. – 583 с.

Поступила 01.03.2012

УДК 531.3+004.02

Д. В. Гапанюк, кандидат физико-математических наук, старший преподаватель (БГТУ);  
Е. В. Русак, студент (БГТУ)

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ МАШИННЫХ АГРЕГАТОВ С ПОМОЩЬЮ MATHCAD

В работе использовали пакет Mathcad для решения задач динамического анализа и синтеза рычажных механизмов с низшими кинематическими парами. Описана методика оцифровки индикаторных диаграмм. Приведено решение дифференциального уравнения движения машины с учетом реальной механической характеристики двигателя.

Package Mathcad is used for the decision of problems of the dynamic analysis and synthesis of lever mechanisms with the lowest kinematic couples. The technique of numbering of display diagrams is described. The decision of the differential equation of movement of the car taking into account the real mechanical characteristic of the engine is described.

**Введение.** При проектировании отдельных механизмов машинного агрегата с применением Mathcad предоставляется возможность решения задач динамики машинного агрегата в целом. Покажем эту возможность дополнительного расширения и углубления задач курсового проектирования по теории механизмов и машин на основании имеющихся разработок по проектированию рычажных, зубчатых и кулачковых механизмов [1]. В качестве примера рассмотрим проектирование агрегата кривошипно-рычажных летучих ножниц [2] (рис. 1).

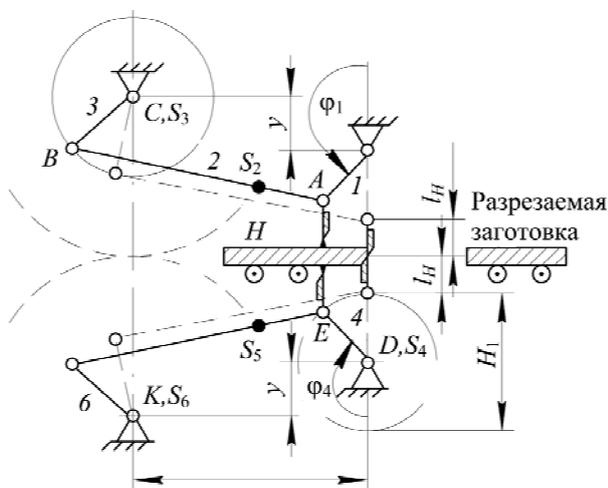


Рис. 1. Кривошипно-рычажные летучие ножницы

**Методика расчета.** На первой стадии проектирования осуществляется расчет динамических характеристик рычажного механизма по методике, изложенной в работах [3, 4]. Сначала используя метод замкнутых контуров, составляется система уравнений, позволяющая найти функции положения механизма. По рассчитанным функциям осуществляется компьютерное построение схемы механизма и видеофильм, отражающий движение рычажного механизма. Определяются крайние положения и находятся первые и вторые передаточные функции, необ-

ходимые для выполнения динамического синтеза и анализа. На данной стадии проектирования осуществляется динамическое исследование механизма по общепринятой методике, подбирается момент инерции маховика, находится момент двигателя, выполняется расчет реакций в кинематических парах. Этот этап используется как первое приближение для последующего уточнения. Поэтому на данном этапе силы производственных сопротивлений принимаются постоянными на рабочем ходу. Их значение оценивается из условия равенства работ сил полезных сопротивлений за цикл или по другим соображениям.

Далее с помощью пакетов Mathcad и Компас выполняется синтез зубчатых и кулачковых механизмов. Проектирование планетарной ступени осуществляется по условиям сборки, соседства и соосности. При этом пакет Mathcad используется на двух уровнях: или с помощью программ, приведенных в курсе лекций [1], или путем непосредственного визуального анализа расчетов.

Помимо рычажного и зубчатого механизмов, в машинный агрегат входят электродвигатель и кулачковый механизм. Для проектированию кулачкового механизма применяется методика, изложенная в работе [1]. Динамические характеристики отдельных механизмов используются для определения в дальнейшем соответствующих характеристик агрегата.

**Оцифровка индикаторных диаграмм.** Непосредственно при переходе к проектированию машинного агрегата в первую очередь необходимо учесть изменение усилия резания, представленное на диаграмме. Для этого надо решить два вопроса: это оцифровка индикаторной диаграммы, с последующим применением интерполяции. При этом необходимо предварительно установить соответствие между значением аргумента на диаграмме и номером положения механизма. (При компьютерном подходе рассматривается 360 положений:  $i = 1..360$ .)

Для решения этой задачи разработана виртуальная лабораторная работа, где рассматри-